

Рис. 1. Кинетические кривые расходования этилена для систем:

1— 1-(2-метоксифенил)-3-тиофенил-5-(бензтиазол-2-ил) формазанат железа (L_2M)/ $AlC_2H_5Cl_2$

2— бис-[1-(2-метоксифенил)-3-фурил-5-(бензтиазол-2-ил)] формазанат железа (LM_2)/ $AlC_2H_5Cl_2$

Хотя большая стерическая нагруженность молекулы комплексного соединения должна эффективнее препятствовать контактам активных центров друг с другом, присутствие большой доли органической фазы на один атом металла не способствует значительному повышению каталитической активности.

Поэтому продолжение синтеза и исследование полиядерных формазанатов железа необходимо вести в направлении широкого разнообразия заместителей в исходной молекуле формазана.

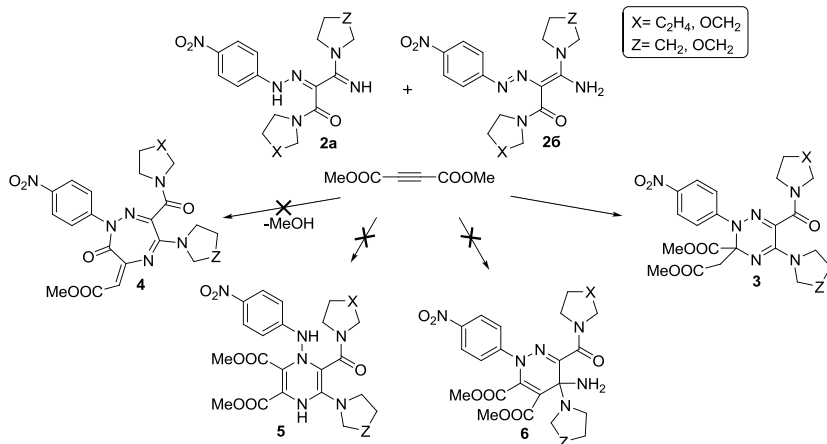
Работа выполнена при финансовой поддержке грантов РФФИ №11-03-90724-моб_ст, №11-03-00181а.

ИССЛЕДОВАНИЕ РЕАКЦИИ ГИДРАЗОНАМИДИНОВ С ДИМЕТИЛОВЫМ ЭФИРОМ АЦЕТИЛЕНДИКАРБОНОВОЙ КИСЛОТЫ ТЕОРЕТИЧЕСКИМИ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫМИ МЕТОДАМИ

Петрова К.Д., Лесогорова С.Г., Бельская Н.П.

Уральский федеральный университет
620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19

Важным аспектом реакционной способности гидразонамидинов² является наличие в их молекуле нескольких нуклеофильных центров, что создает возможности для синтеза азотсодержащих гетероциклов в реакциях этих соединений с бис-электрофилами. Удобным циклизующим реагентом для гетероциклизации таких соединений является диметилловый эфир ацетилендикарбонвой кислоты. Следует отметить, что структуры гидразонамидинов² содержат несколько реакционных центров, а также системы сопряженных двойных связей, что позволяет прогнозировать реализацию нескольких направлений циклизации.



Взаимодействие соединений **2** с ДМАД в толуоле при кипячении привело к получению 2,3-дигидро-1,2,4-триазинов **3**, являющихся продуктом геминального присоединения двух нуклеофильных центров к тройной связи. Структура синтезированных веществ **3** подтверждена с помощью спектральных данных и данных рентгеноструктурного анализа.

С помощью универсального пакета квантово-химических программ GAMESS исследованы основные закономерности протекания изучаемой реакции. Расчет производился полуэмпирическим методом MNDO/PM3.

1. Bel'skaya N. P., Demina M. A., Sapognikova S. G. et al. // ARKIVOC. - 2008. - Part XVI. С. 9-21.

Работа выполнена при финансовой поддержке грантов РФФИ (гранты № 11-03-00579-р_урал_a и № 08-03-00376-р_урал_a).